

Esercitazione 04

08 novembre 2024

Densità di corrente 1D (flusso di probabilità)

La densità di probabilità della posizione di una particella è data da

$$\rho(x, t) = |\psi(x)|^2,$$

la densità di corrente, o flusso di probabilità è definita come

$$J = \frac{\hbar}{i2m} \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right] = \frac{\hbar}{m} \Im \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right].$$

Dall'equazione di Schroedinger si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi^* \frac{d\psi}{dt} + \psi \frac{d\psi^*}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) |\psi(x)|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} - V(x) |\psi(x)|^2 \right) = \\ &= i \frac{\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} J = \frac{\hbar}{i2m} \left(\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} \right),$$

per cui è soddisfatta l'equazione di continuità

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} J = 0.$$

In 3D la corrente è definita come

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{i2m} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] = \frac{\hbar}{m} \Im [\psi^* \nabla \psi],$$

e l'equazione di continuità è

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0.$$

Particelle in 1D

- Il problema generale è

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = E \psi(x),$$

- Nel caso di stati non legati consideriamo un'onda incidente da sinistra e^{ikx} che viene parzialmente riflessa e trasmessa da un potenziale. Per cui a sinistra del potenziale si ha

$$\psi_L(x) = e^{ikx} + C_R e^{-ikx},$$

a destra del potenziale

$$\psi_R(x) = C_T e^{iqx}.$$

- In un punto di raccordo del potenziale la corrente, data da

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - c.c. \right) = \frac{\hbar}{m} \begin{cases} k(1 - |C_R|^2) & \text{Left} \\ q|C_T|^2 & \text{Right} \end{cases}$$

deve mantenersi costante, per cui

$$k(1 - |C_R|^2) = q|C_T|^2.$$

La corrente in entrata è

$$j_I = \frac{\hbar}{m} k,$$

quella riflessa

$$j_R = -\frac{\hbar}{m} k |C_R|^2,$$

e quella trasmessa

$$j_T = \frac{\hbar}{m} q |C_T|^2,$$

quindi il **coefficiente di riflessione** è

$$R \doteq \left| \frac{j_R}{j_I} \right| = |C_R|^2,$$

e il **coefficiente di trasmissione** è

$$T \doteq \left| \frac{j_T}{j_I} \right| = \frac{q}{k} |C_T|^2$$

e per la conservazione del flusso

$$T + R = 1.$$

Proprietà generali dei sistemi unidimensionali

Consideriamo il problema

$$\psi''(x) + (\epsilon - U(x)) \psi(x) = 0, \quad (1)$$

con $U(x)$ funzione limitata inferiormente, continua o discontinua con discontinuità di prima specie e che all'infinito tende a infinito o a costante.

- Con queste assunzioni, la funzione d'onda e la sua derivata devono essere continue.
- Se il potenziale va a infinito per x finito, qui la derivata può essere discontinua.
- La funzione d'onda deve essere a un sol valore (si deve associare solo un valore di probabilità a ciascun intorno di x).
- *Le soluzioni di (1) possono essere scelte reali.* Supponiamo infatti che ψ_1 sia una funzione complessa che soddisfa (1). Il complesso coniugato dell'equazione (1) è

$$(\psi^*)''(x) + (\epsilon - U(x)) \psi^*(x) = 0,$$

quindi anche ψ_1^* soddisfa la (1). Possiamo quindi scegliere la soluzione

$$\psi_r = \psi_1 + \psi_1^*,$$

che è reale.

- Possiamo dividere l'asse reale in due tipi di regione

– **Tipo I:** in cui $\epsilon < U(x)$. Qui

$$\frac{\psi''}{\psi} > 0,$$

ossia la concavità della funzione d'onda è rivolta in direzione opposta all'asse x . Questo significa che nella regione I ci può essere al più uno zero (nodo) della funzione

– **Tipo II:** in cui $\epsilon > U(x)$. Qui

$$\frac{\psi''}{\psi} < 0,$$

ossia la concavità della funzione d'onda è rivolta verso l'asse x . In questa regione ci possono essere più nodi della funzione. Notare che un intervallo esterno di tipo II può dar luogo soltanto a un comportamento oscillante con infiniti zeri oppure ad un andamento asintotico costante diverso da zero.

- I flessi della funzione si incontrano soltanto nei nodi e nei punti di passaggio da una regione I a una regione II .
- *Non esistono soluzioni con energia $\epsilon < U_{min}$.* Se esistessero, non ci sarebbero mai regioni di tipo II per cui la funzione d'onda avrebbe una concavità tale per cui la funzione d'onda deve per forza divergere e quindi non sarebbe normalizzabile.
- Si possono avere stati legati solo se gli intervalli esterni sono di tipo I . Un intervallo esterno di tipo II si ha se $U \rightarrow U_\infty$ costante e $\epsilon > U_\infty$. In questo caso, asintoticamente si avrebbe

$$\psi''(x) + (\epsilon - U_\infty) \psi(x) = 0,$$

che dà luogo a un andamento periodico.

- Aumentando la zona II aumenta $\left| \frac{\psi''}{\psi} \right|$, ossia il raggio di curvatura diminuisce e questo favorisce comportamenti oscillanti.
- La funzione d'onda dell' n -simo livello discreto di energia ha $n - 1$ nodi (zeri). Infatti partendo da $\epsilon < U_{min}$ imponiamo che la soluzione vada a zero in $-\infty$ e che sia positiva. Da quanto detto essa sarà una funzione monotona crescente e quindi non normalizzabile. Aumentando ϵ la funzione inizierà ad divergere più lentamente fino a quando ϵ supererà U_{min} . Vi saranno quindi due punti di passaggio x_1 e x_2 nei quali la funzione svilupperà un flesso, questo diminuirà ancor di più la pendenza della funzione che, per un certo ϵ_0 finirà per convergere anche a ∞ : questo è il primo stato legato che, per come è stato costruito, non ha nodi. Continuando ad aumentare ϵ , si svilupperà un nodo nella regione I esterna che però darà luogo ancora una volta a un comportamento divergente. Proseguendo, il nodo si sposterà nella zona II e da questo momento in poi la coda destra della funzione comincerà nuovamente ad avvicinarsi ad x fino a convergere per un valore ϵ_1 : il primo stato eccitato. Continuando così si vede che passando al successivo stato eccitato si genera un nuovo nodo.
- Se L'Hamiltoniana commuta con l'operatore parità (ossia se $U(x) = U(-x)$)

$$[\mathbf{H}, \mathbf{\Pi}] = 0,$$

allora gli autostati sono funzioni pari o dispari. Nel caso di stati legati, essendo non degeneri, la parità è fissata. Lo stato fondamentale deve essere pari perché non ha nodi. il primo eccitato è dispari e così via alternandosi. Nel caso di stati di diffusione dello spettro continuo, essendo degeneri è possibile costruire autostati di parità non definita.

Oscillatore armonico 1D

L'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico è

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \mathbf{x}^2}{2}.$$

- Dai teoremi generali sulla particella in una dimensione, possiamo dire che
 1. Lo spettro è limitato inferiormente;
 2. Le energie sono positive;
 3. gli autostati delle energie sono tutti legati;
 4. Lo spettro è non degenere;
 5. Poiché $[\mathbf{H}, \mathbf{\Pi}] = 0$ gli autostati sono pari o dispari con parità $(-1)^n$
- Si possono introdurre le variabili adimensionali

$$\hat{\xi} = \frac{\mathbf{x}}{\ell}, \quad \hat{\pi} = \frac{\mathbf{p}}{m\omega\ell},$$

e imponendo che

$$[\hat{\xi}, \hat{\pi}] = i\mathbf{I}$$

si ottiene la **lunghezza tipica** dell'oscillatore armonico

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

- Allo stesso modo si possono introdurre gli stati continui adimensionali $|\xi\rangle$

$$\langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi') = \delta\left(\frac{1}{\ell}(x - x')\right) = \ell \delta(x - x') = \ell \langle x | x' \rangle,$$

per cui

$$|\xi\rangle = \sqrt{\ell} |x\rangle.$$

In questa base gli elementi di $\hat{\pi}$ sono

$$\begin{aligned}\langle \xi | \hat{\pi} | \xi' \rangle &= \frac{\ell^2}{\hbar} \langle x | \mathbf{p} | x' \rangle = -i\ell^2 \frac{d}{dx} \delta(x - x') = \\ &= -i\ell^2 \frac{d}{dx} \delta(\ell(\xi - \xi')) = -i\ell \frac{d}{d\xi} \delta(\xi - \xi') = \\ &= -i \frac{d}{d\xi} \delta(\xi - \xi').\end{aligned}$$

Nel passare dalle variabili originali a quelle adimensionali

$$\langle x | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \langle \xi | \psi \rangle.$$

- Introduciamo gli operatori di **creazione e distruzione** (adimensionali)

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &= \ell \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, & \hat{\xi} &= \frac{\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, \\ \mathbf{p} &= i \frac{\hbar}{\ell} \frac{\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}}{\sqrt{2}}, & \hat{\pi} &= i \frac{\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}}{\sqrt{2}}, \\ \mathbf{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mathbf{x}}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} \mathbf{p} \right) = \frac{\hat{\xi} - i \hat{\pi}}{\sqrt{2}}, \\ \mathbf{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mathbf{x}}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} \mathbf{p} \right) = \frac{\hat{\xi} + i \hat{\pi}}{\sqrt{2}},\end{aligned}$$

che soddisfano la regola di commutazione (operatori bosonici)

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{I}.$$

- Si definisce l'operatore hermitiano “**numero**”

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}^\dagger = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$$

che soddisfa le relazioni

$$[\mathbf{n}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}, \quad [\mathbf{n}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{a}^\dagger.$$

- Ricordiamo (vedere note di Metodi I) che gli autovalori di $\mathbf{n}$ sono i numeri interi

$$\mathbf{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

e che

$$\begin{aligned}\mathbf{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ \mathbf{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle.\end{aligned}$$

- Nei nuovi operatori l'Hamiltoniana si scrive come

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right),$$

quindi $[\mathbf{H}, \mathbf{n}] = 0$ ossia

$$\begin{aligned}\mathbf{H} |n\rangle &= E_n |n\rangle, \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).\end{aligned}$$

- Gli elementi di matrice degli operatori di creazione e distruzione sono, nella posizione

$$\begin{aligned}\langle x | \mathbf{a}^\dagger | x' \rangle &= \delta(x - x') \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - \ell \frac{\partial}{\partial x'} \right), \\ \langle x | \mathbf{a} | x' \rangle &= \delta(x - x') \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} + \ell \frac{\partial}{\partial x'} \right),\end{aligned}$$

nella posizione adimensionalizzata

$$\langle \xi | \mathbf{a}^\dagger | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi') \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi'} \right),$$

$$\langle \xi | \mathbf{a} | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi') \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi'} \right),$$

negli autostati di $\mathbf{n}$

$$\langle n | \mathbf{a}^\dagger | n' \rangle = \sqrt{n' + 1} \delta_{n, n'+1},$$

$$\langle n | \mathbf{a} | n' \rangle = \sqrt{n'} \delta_{n, n'-1}.$$

- Evoluzione temporale degli operatori

$$\dot{\mathbf{a}} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{a}] = -i\omega \mathbf{a} \implies \mathbf{a}(t) = e^{-i\omega t} \mathbf{a},$$

$$\dot{\mathbf{a}}^\dagger = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{a}^\dagger] = i\omega \mathbf{a}^\dagger \implies \mathbf{a}^\dagger(t) = e^{-i\omega t} \mathbf{a}^\dagger.$$

- Funzione d'onda dello stato fondamentale

$$\begin{aligned} \langle \xi | \mathbf{a} | 0 \rangle &= \int d\xi' \langle \xi | \mathbf{a} | \xi' \rangle \langle \xi' | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\xi' \delta(\xi - \xi') \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi'} \right) \psi_0(\xi') = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi \psi_0(\xi) + \psi_0'(\xi)) = 0, \end{aligned}$$

ossia

$$\xi \psi_0(\xi) + \psi_0'(\xi) = 0,$$

la cui soluzione normalizzata è una funzione gaussiana

$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

- Costruzione ricorsiva degli stati eccitati:

$$\begin{aligned} \langle \xi | \mathbf{a}^\dagger | n \rangle &= \int d\xi' \langle \xi | \mathbf{a}^\dagger | \xi' \rangle \langle \xi' | n \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\xi' \delta(\xi - \xi') \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi'} \right) \psi_n(\xi') = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi \psi_n(\xi) - \psi_n'(\xi)). \end{aligned}$$

Ne deriva la legge di ricorrenza

$$\psi_{n+1}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} (\xi \psi_n(\xi) - \psi_n'(\xi)).$$

- Partendo dallo stato fondamentale, il primo stato eccitato è

$$\psi_1(\xi) \propto \xi \psi_0(\xi),$$

il secondo

$$\psi_2(\xi) \propto (a_2 \xi^2 + b_2) \psi_0(\xi),$$

il terzo

$$\psi_3(\xi) \propto (a_3 \xi^3 + b_3 \xi) \psi_0(\xi),$$

e così via. Si vede quindi che la struttura delle funzioni d'onda è la seguente

$$\psi_n(\xi) = \alpha_n P_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

dove P_n è un polinomio di grado n . Utilizzando la legge di ricorrenza si ottiene

$$\alpha_{n+1} P_{n+1}(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \frac{\alpha_n}{\sqrt{2(n+1)}} (2\xi P_n(\xi) - P_n'(\xi)) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

ossia

$$\alpha_{n+1} P_{n+1}(\xi) = \frac{\alpha_n}{\sqrt{2(n+1)}} (2\xi P_n(\xi) - P'_n(\xi)),$$

se impongo che

$$\alpha_{n+1} = \frac{\alpha_n}{\sqrt{2(n+1)}}$$

si ottiene

$$P_{n+1}(\xi) = 2\xi P_n(\xi) - P'_n(\xi),$$

che è soddisfatta dai polinomi di Hermite $H_n(\xi)$ con $\alpha_n = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}}$. Per cui

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \psi_n(\xi) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi \ell}} \right)^{\frac{1}{2}} H_n\left(\frac{x}{\ell}\right) e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}}$$

Polinomi di Hermite

- Intervallo: $[-\infty, \infty]$
- Funzione peso: $w = e^{-x^2}$
- Funzione generatrice: $g(t, x) = e^{-t^2 + 2xt}$
- Formula di Rodriguez: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$
- Ortogonalità: $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m}$
- Ricorrenza: $H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$
- Valori espliciti dei primi polinomi:

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2x \\ H_2 &= 4x^2 - 2 \\ H_3 &= 8x^3 - 12x \\ H_4 &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \end{aligned}$$

Valori medi su autostati dell'oscillatore armonico

$$\begin{aligned} \langle n | \mathbf{x}^2 | n \rangle &= \frac{\ell^2}{2} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a})^2 | n \rangle = \frac{\ell^2}{2} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger) | n \rangle = \\ &= \frac{\ell^2}{2} \langle n | (2\mathbf{n} + 1) | n \rangle = \frac{\ell^2}{2} (2n + 1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n | \mathbf{x}^4 | n \rangle &= \frac{\ell^4}{4} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a})^4 | n \rangle = \frac{\ell^4}{4} \langle n | (\mathbf{a}^{\dagger 2} \mathbf{a}^2 + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}^2 \mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a} \mathbf{a}^{\dagger 2} \mathbf{a} + \mathbf{a}^2 \mathbf{a}^{\dagger 2}) | n \rangle = \\ &= \frac{\ell^4}{4} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger (\mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger - 1) \mathbf{a} + \mathbf{n}^2 + 2\mathbf{n}(1 + \mathbf{n}) + (1 + \mathbf{n})^2 + \mathbf{a}(1 + \mathbf{n}) \mathbf{a}^\dagger) | n \rangle = \\ &= \frac{\ell^4}{4} \langle n | (2\mathbf{n}^2 - \mathbf{n} + 2\mathbf{n}(1 + \mathbf{n}) + 2(1 + \mathbf{n})^2 + (1 + \mathbf{n})) | n \rangle = \\ &= \frac{3\ell^4}{4} \langle n | (2\mathbf{n}^2 + 2\mathbf{n} + 1) | n \rangle = \frac{3\ell^4}{4} (2n^2 + 2n + 1). \end{aligned}$$

$$\Delta(\mathbf{x}^2)^2 = \langle n | \mathbf{x}^4 | n \rangle - \langle n | \mathbf{x}^2 | n \rangle^2 = \frac{\ell^4}{4} (6n^2 + 6n + 3 - 2n^2 - 1 - 4n) = \frac{\ell^4}{2} (2n^2 + n + 1)$$

$$\begin{aligned} \langle n | \mathbf{p}^2 | n \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a})^2 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger) | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\ell^2} \langle n | (2\mathbf{n} + 1) | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} (2n + 1) \end{aligned}$$

$$\langle \mathbf{x}^2 \rangle \langle \mathbf{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} (2n+1)^2$$

$$\begin{aligned} \langle n | \mathbf{p}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar^4}{4\ell^4} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a})^4 | n \rangle = \frac{\hbar^4}{4\ell^4} \langle n | (\mathbf{a}^{\dagger 2} + \mathbf{a}^2 - \mathbf{I} - 2\mathbf{n})^2 | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar^4}{4\ell^4} \langle n | (\mathbf{a}^{\dagger 2} \mathbf{a}^2 + \mathbf{a}^2 \mathbf{a}^{\dagger 2} + \mathbf{I} + 4\mathbf{n} + 4\mathbf{n}^2) | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar^4}{4\ell^4} \langle n | (\mathbf{a}^\dagger (\mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger - 1) \mathbf{a} + \mathbf{a} (1 + \mathbf{n}) \mathbf{a}^\dagger + \mathbf{I} + 4\mathbf{n} + 4\mathbf{n}^2) | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar^4}{4\ell^4} \langle n | (3\mathbf{I} + 6\mathbf{n} + 6\mathbf{n}^2) | n \rangle = \frac{3\hbar^4}{4\ell^4} (2n^2 + 2n + 1). \end{aligned}$$

$$\Delta (\mathbf{p}^2)^2 = \langle n | \mathbf{p}^4 | n \rangle - \langle n | \mathbf{p}^2 | n \rangle^2 = \frac{\hbar^4}{2\ell^4} (2n^2 + n + 1)$$

$$\Delta (\mathbf{x}^2)^2 \Delta (\mathbf{p}^2)^2 = \frac{\hbar^4}{4} (2n^2 + n + 1)^2.$$

Esercizi svolti a lezione

Esercizio 1. Data la buca di potenziale infinita simmetrica di larghezza L e partendo dallo stato fondamentale, rimuovere il potenziale e studiare l'evoluzione della funzione d'onda.

Sol: La funzione d'onda iniziale è

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{\pi}{L} x & |x| < \frac{L}{2} \\ 0 & |x| > \frac{L}{2}, \end{cases}$$

nello spazio dei momenti

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{L\pi}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx e^{-ikx} \cos \frac{\pi}{L} x = -4\sqrt{\pi L} \frac{\cos k \frac{L}{2}}{(k^2 L^2 - \pi^2)}.$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \phi(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}$$

$$\phi(k, t) = \phi(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}.$$

L'impulso è una costante del moto, quindi nel tempo i suoi momenti non evolvono

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi(k)|^2 k = 0,$$

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi(k)|^2 k^2 = 16\pi\hbar^2 L \int_{-\infty}^{\infty} dk k^2 \frac{\cos^2 k \frac{L}{2}}{(k^2 L^2 - \pi^2)^2} < \infty.$$

Del resto

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \langle \psi(x, t=0) | \mathbf{p}^2 | \psi(x, t=0) \rangle = 2mE_1 = \frac{\hbar^2}{L^2} \pi^2$$

Esercizio 2. Potenziale a δ . Data una particella di massa m in una dimensione sottoposta al potenziale

$$U(x) = g\delta(x)$$

calcolare spettro e autostati dell'Hamiltoniana per valori di g negativi e positivi.

Sol: Assumendo la continuità della funzione d'onda, nel caso di potenziale a δ la derivata prima è in generale discontinua, infatti integrando in un intorno di $x=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi''(x) = -g \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \delta(x) \psi(x) + E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x),$$

mandando ϵ a zero si ottiene

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mg}{\hbar^2} \psi(0).$$

Dividiamo lo spazio in due intervalli: I per $x < 0$ e II per $x > 0$

- **Caso** $g < 0$ e $E < 0$. Ci sono stati legati, indichiamo $k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$

$$\psi_I = Ae^{kx},$$

$$\psi_{II} = Be^{-kx}.$$

Per la continuità della ψ

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A = B,$$

mentre la condizione sulla derivata prima dà

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) - \frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0) \Rightarrow kA = -\frac{mg}{\hbar^2}A$$

ossia esiste un solo stato legato con energia

$$E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2},$$

e funzione d'onda

$$\psi(0) = \sqrt{\frac{mg}{\hbar^2}} \left(\theta(-x) e^{-\frac{mg}{\hbar^2}x} + \theta(x) e^{\frac{mg}{\hbar^2}x} \right).$$

- **Caso** $g < 0$ e $E > 0$. Stati di scattering $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\psi_I = e^{ikx} + C_R e^{-ikx},$$

$$\psi_{II} = C_T e^{ikx}.$$

Le condizioni al raccordo sono

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow 1 + C_R = C_T,$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) - \frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0) \Rightarrow ik(1 - C_R) = \left(ik - \frac{k^2g}{E}\right)C_T,$$

$$1 = \left(1 + \frac{ikg}{2E}\right)C_T \Rightarrow C_T = \frac{2E}{2E - ikg}$$

$$C_R = C_T - 1 = \frac{ikg}{2E - ikg}$$

$$T = |C_T|^2 = \frac{4E^2}{4E^2 + k^2g^2} = \frac{1}{1 + \frac{mg^2}{2\hbar^2E}},$$

$$R = |C_R|^2 = \frac{1}{\frac{2E\hbar^2}{mg^2} + 1}.$$

Notare che torna con il caso limite della buca di potenziale.

- **Caso** $g > 0$ e $E > 0$. Il problema è analogo a quello precedente ma con g positiva, i coefficienti di trasmissione e riflessione rimangono inalterati.

Esercizio 3. Un oscillatore armonico di frequenza ω si trova in uno stato in cui una misura di energia può fornire solo i valori E_0 (stato fondamentale) ed E_1 (primo stato eccitato) in maniera equiprobabile. Inoltre il valor medio dell'impulso al tempo $t = 0$ è

$$\langle \mathbf{p}(0) \rangle = \frac{\hbar}{\ell\sqrt{2}}$$

dove ℓ è la lunghezza fondamentale dell'oscillatore armonico.

1. Determinare l'insieme di stati che soddisfino tali condizioni.
2. Il sistema evolve fino al tempo t^* per cui $\langle \mathbf{x}(t^*) \rangle = \langle \mathbf{x}(0) \rangle$. A questo tempo si esegue una misura di energia, determinare con che probabilità si ottiene il valore $\frac{3}{2}\hbar\omega$.
3. Determinare l'evoluzione temporale del sistema dopo la misura.

Sol: Lo stato ha la forma

$$|\psi(0)\rangle = e^{i\varphi} \left(\frac{|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle}{\sqrt{2}} \right).$$

Sfruttiamo la condizione ulteriore data

$$\langle \mathbf{p}(0) \rangle = \langle \psi(0) | i \frac{\hbar}{\ell\sqrt{2}} (\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}) | \psi(0) \rangle = i \frac{\hbar}{\ell 2\sqrt{2}} (e^{-i\phi} - e^{i\phi}) = \frac{\hbar}{\ell\sqrt{2}},$$

quindi

$$\sin \phi = 1,$$

condizione che si verifica soltanto se $\phi = \frac{\pi}{2}$, ossia

$$|\psi(0)\rangle = e^{i\varphi} \frac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Al tempo iniziale

$$\langle \mathbf{x}(0) \rangle = \langle \psi(0) | \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}) | \psi(0) \rangle = \frac{\ell}{2\sqrt{2}} (i - i) = 0.$$

L'evoluzione temporale dello stato è

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi} \frac{e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} |0\rangle + i e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} |1\rangle}{\sqrt{2}} = e^{i(\varphi + \frac{\omega}{2}t)} \frac{|0\rangle + i e^{-i\omega t} |1\rangle}{\sqrt{2}},$$

$$\langle \mathbf{x}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}) | \psi(t) \rangle = \frac{\ell}{2\sqrt{2}} (i e^{-i\omega t} - i e^{i\omega t}) = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \sin \omega t.$$

Tale valor medio si annulla di nuovo per $t^* = \frac{\pi}{\omega}$ ed in questo istante lo stato è

$$|\psi(t^*)\rangle = e^{i(\varphi + \frac{\pi}{2})} \frac{|0\rangle - i|1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

La probabilità di misurare l'energia E_1 è

$$p(E_1) = \frac{1}{2}.$$

Dopo la misura lo stato evolve soltanto per un fattore di fase globale

$$|\psi(t > t^*)\rangle \propto e^{-i\frac{3}{2}\omega t} |1\rangle.$$

Compiti per casa

Esercizio 4. La probabilità di trovare una particella in una dimensione nell'intervallo $[-a/2, a/2]$ è costante, mentre la probabilità di trovare tale particella in qualsiasi punto all'esterno di tale intervallo è nulla. La corrente associata alla particella è nulla. Quale è la densità di probabilità di trovare la particella con impulso p ?

Sol: La funzione d'onda ha la forma

$$\psi(x) = \rho(x) e^{i\theta(x)},$$

con

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} & |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{altrove} \end{cases}.$$

La corrente è

$$j(x) = \frac{\hbar}{m} \Im \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right] = \frac{\hbar}{m} \Im [\rho(\rho' + i\theta'\rho)] = \frac{\hbar}{m} \theta' \rho^2 = 0,$$

quindi

$$\theta(x) = \text{cost} = \alpha.$$

Nella rappresentazione della quantità di moto

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx e^{-i\frac{px}{\hbar}} = \\ &= e^{i\alpha} \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}} \frac{\sin \frac{ap}{2\hbar}}{p},\end{aligned}$$

quindi

$$|\phi(p)|^2 = \frac{2\hbar}{\pi a} \frac{\sin^2 \frac{ap}{2\hbar}}{p^2}.$$

Esercizio 5. Una particella di massa m è vincolata su di un segmento unidimensionale di lunghezza L . Al tempo $t = 0$ si trova in uno stato

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\sin \frac{\pi}{L} x + 2e^{i\theta} \sin \frac{\pi}{L} x \cos \frac{\pi}{L} x \right)$$

1. Determinare la corrente associata in funzione di θ .
2. Determinare la probabilità di ottenere in una misura l'energia dello stato fondamentale E_1 .
3. Determinare l'evoluzione temporale dello stato.

Sol: La corrente è

$$\begin{aligned}j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right] = \\ &= \frac{\hbar\pi}{L^2 m} \Im \left[\left(\sin \frac{\pi}{L} x + e^{-i\theta} \sin 2\frac{\pi}{L} x \right) \left(\cos \frac{\pi}{L} x + 2e^{i\theta} \cos 2\frac{\pi}{L} x \right) \right] = \\ &= \frac{\hbar\pi}{L^2 m} \Im \left[2e^{i\theta} \sin \frac{\pi}{L} x \cos 2\frac{\pi}{L} x + e^{-i\theta} \sin 2\frac{\pi}{L} x \cos \frac{\pi}{L} x \right] = \\ &= \frac{\hbar\pi}{L^2 m} \sin \theta \left(2 \sin \frac{\pi}{L} x \cos 2\frac{\pi}{L} x - \sin 2\frac{\pi}{L} x \cos \frac{\pi}{L} x \right) = \\ &= \frac{\hbar\pi}{L^2 m} \sin \theta \left(2 \sin \frac{\pi}{L} x \cos^2 \frac{\pi}{L} x - 2 \sin^3 \frac{\pi}{L} x - 2 \sin \frac{\pi}{L} x \cos^2 \frac{\pi}{L} x \right) = \\ &= -\frac{2\hbar\pi}{L^2 m} \sin \theta \sin^3 \frac{\pi}{L} x.\end{aligned}$$

Lo stato è una combinazione dei primi due autostati

$$|\psi\rangle = \frac{|1\rangle + e^{i\theta} |2\rangle}{\sqrt{2}},$$

quindi

$$P_1 = \frac{1}{2}.$$

Le energie del sistema sono

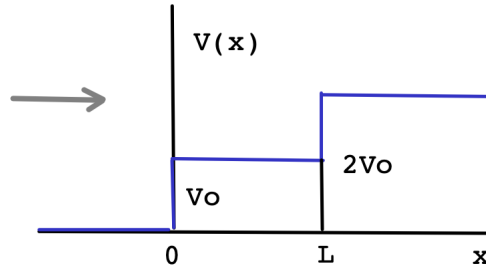
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \frac{n^2}{L^2 m},$$

quindi l'evoluzione dello stato è

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-i\frac{\pi^2 \hbar}{2L^2 m} t} |1\rangle + e^{-i2\frac{\pi^2 \hbar}{L^2 m} t} e^{i\theta} |2\rangle}{\sqrt{2}} \propto \frac{|1\rangle + e^{-i3\frac{\pi^2 \hbar}{2L^2 m} t} e^{i\theta} |2\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Esercizio 6. Impostare il seguente problema. Un fascio di particelle incide sulla barriera mostrata in figura. Quando $E > 2V_0$:

1. Scrivere la forma generale delle funzioni d'onda nelle diverse regioni spaziali
2. Determinare le correnti incidenti, riflesse e trasmesse ed esprimere i coefficienti di riflessione e trasmissione



Sol: La soluzione di

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi(x),$$

per $E > 2V_0$ non è normalizzabile e ha la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x} & x < 0 \\ Be^{ik_2x} + Ce^{-ik_2x} & 0 < x < L \\ De^{ik_3x} & x > L \end{cases}$$

con $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$, $k_3 = \sqrt{\frac{2m(E-2V_0)}{\hbar^2}}$. Le condizioni di raccordo sono

$$\begin{aligned} 1 + A &= B + C \\ Be^{i(k_2-k_3)L} + Ce^{-i(k_2+k_3)L} &= D \\ 1 - A &= \frac{k_2}{k_1} (B - C) \\ Be^{i(k_2-k_3)L} - Ce^{-i(k_2+k_3)L} &= \frac{k_3}{k_2} D. \end{aligned}$$

La corrente è

$$j(x) = \frac{\hbar}{m} \begin{cases} k_1 (1 - |A|^2) & x < 0 \\ k_2 (|B|^2 - |C|^2) & 0 < x < L \\ k_3 |D|^2 & x > L \end{cases}$$

dalla quale si ricavano le correnti incidente, riflessa e trasmessa

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{\hbar}{m} k_1, \\ j_r &= -\frac{\hbar}{m} k_1 |A|^2, \\ j_t &= -\frac{\hbar}{m} k_3 |D|^2, \end{aligned}$$

corrispondenti ai coefficienti

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{j_r}{j_i} \right| = |A|^2, \\ T &= \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = \frac{k_3}{k_1} |D|^2. \end{aligned}$$

Determiniamo le costanti

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2k_2} (k_2 + k_3) e^{-i(k_2-k_3)L} D, \\ C &= \frac{1}{2k_2} (k_2 - k_3) e^{i(k_2+k_3)L} D, \\ 1 + A &= \frac{D}{2k_2} \left[(k_2 + k_3) e^{-i(k_2-k_3)L} + (k_2 - k_3) e^{i(k_2+k_3)L} \right], \\ 1 - A &= \frac{D}{2k_1} \left[(k_2 + k_3) e^{-i(k_2-k_3)L} - (k_2 - k_3) e^{i(k_2+k_3)L} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D &= \frac{4k_1k_2}{(k_1k_2 + k_1k_3 + k_2^2 + k_2k_3)e^{-i(k_2-k_3)L} + (k_1k_2 - k_1k_3 - k_2^2 + k_2k_3)e^{i(k_2+k_3)L}} = \\
&= \frac{4}{\left(1 + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} + \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{-i(k_2-k_3)L} + \left(1 - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} - \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{i(k_2+k_3)L}} \\
A &= \frac{D}{4} \left[\left(1 + \frac{k_3}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_3}{k_1}\right)e^{-i(k_2-k_3)L} + \left(1 - \frac{k_3}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_3}{k_1}\right)e^{i(k_2+k_3)L} \right] = \\
&= \frac{D}{4} \left(1 + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} - \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}} \right) e^{-i(k_2-k_3)L} + \\
&\quad + \frac{D}{4} \left(1 - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} + \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}} \right) e^{i(k_2+k_3)L} \\
&= \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} - \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{-i(k_2-k_3)L} + \left(1 - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} + \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{i(k_2+k_3)L}}{\left(1 + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} + \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{-i(k_2-k_3)L} + \left(1 - \sqrt{\frac{E-2V_0}{E-V_0}} - \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} + \sqrt{\frac{E-2V_0}{E}}\right)e^{i(k_2+k_3)L}}
\end{aligned}$$